物性研究　62－3（1994－6）

コメント

原山卓久、首藤啓著「Dispersing Billiardsの半古典論」について

基礎化学研究所 田崎秀一

（1994年3月31日受理）

原山、首藤両氏による表題の論文では、古典的にAnosov系(強いカオス系)であることが証明されている(3つの円弧からなる)ビリヤード系の半古典量子論が議論されている。前半では、GutzwillerのTrace formula、Riemann-Siegel lookalike formulaやNovel Quantizationという種々の方法が適用され、その限界が調べられている。ひとつのモデルを用いて、古典周期軌道の記号表示から始め、Trace formula、それを基礎とするRiemann-Siegel lookalike formulaやNovel Quantizationによる半古典量子化へと議論を進めているため、また、経路積分を利用しないTrace formulaの導出法を紹介しているため、専門外の私にもカオス系の半古典量子論の現状や問題点が見通し良く伝わってきた。後半では、境界要素法と半古典量子化の関係、周期軌道の統計的性質が議論されている。

Schrodinger方程式の数値解法の一つである境界要素法と半古典的な周期軌道量子化が同等であるという指摘は、興味深い。その証明において半古典極限を考え境界要素法に現われる関数((5.1.16)式の $\Delta(E)$)の半古典極限をとるとゼータ関数形のGutzwiller formula (4.3.8)式に比例することが示されているが、$\Delta(E)$ そのものが Hamiltonian H の特性関数

$$\prod_i (E-E_i) = \det(E - H)$$

に比例することを直接示すことも可能なように思われる。

最後の節では、素周期軌道の長さ、壁との衝突回数、不安定性指数の統計的性質を調べ、それらがほぼ乱雑であることが示されているが、これらの量の高次相関や相互相関を調べ、それを用いて統計的にTrace formulaの和を実行することはできないのだろうか？また、不安定性指数の分布(図6.10)は、不安定指数の大きい側にテールを持ちGauss分布からずれている様に見えるが、これにはどのような意味があるのだろうか？さらに、統計的性質が系に含まれるパラメータに依らず普遍性を持つことが指摘されているが、系がAnosov系でなくなる極限(2つの円弧が頂点で接する場合や3つの円弧の半径が無限大になる極限)でこれらの性質がどのように変わっていくかを調べることも興味深いと思われる。

古典カオス系の半古典量子論に対しては、量子力学的計算ができる以上、無意味ではないかという批判を時折耳にする。しかし、半古典的アプローチでは、古典力学的情報から量子力学的量が正確に計算できるばかりでなく、複雑な量子系のふるまいを理解するための見方を得ることができ、この点にこそ半古典論の重要性があると思われる。例えば、高励起分子では非常に複雑なスペクトルがしばしば観測されるが、このような場合、スペクトルをFourier 変換し、'時間的'表示に移ることによりいくつかのピークからなるより単純な自己相関関数が得られ、各ピークがカオス的運動に埋めこまれた古典的周期軌道の周期に対応していることが見い出されている。この例では、複雑なスペクトルを特徴付けるために、古典的な量(軌道の周期)を用いることが不可欠で、その情報から実験結果を説明するには、半古典的アプローチが必要であると言える。従って、応用的な面から見ても、原山、首藤両氏が主張している様に、カオス系の半古典量子化の完成は非常に重要であると考えられる。